

**Заключение диссертационного совета МГУ.014.3
по диссертации на соискание ученой степени кандидата наук**

Решение диссертационного совета от «1» декабря 2023 г. № 164

О присуждении Чистикову Даниилу Николаевичу, гражданину Российской Федерации, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация: «Развитие квантовых и классических методов расчета дипольно-запрещенных спектров малых молекул» по специальности 1.4.4 – «Физическая химия» (физико-математические науки) принята к защите диссертационным советом 29.09.2023, протокол № 155.

Соискатель Чистиков Даниил Николаевич 1996 года рождения в 2023 году окончил очную аспирантуру химического факультета Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова.

Соискатель работает инженером в лаборатории атмосферной спектроскопии Института физики атмосферы имени А.М. Обухова РАН.

Диссертация выполнена в лаборатории квантовой фотодинамики кафедры физической химии химического факультета МГУ им. М.В. Ломоносова.

Научные руководители:

- кандидат физико-математических наук Петров Сергей Владимирович, старший научный сотрудник кафедры физической химии химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова;
- доктор физико-математических наук Вигасин Андрей Алексеевич, главный научный сотрудник лаборатории атмосферной спектроскопии Института физики атмосферы имени А.М. Обухова РАН.

Официальные оппоненты:

- Коузов Александр Петрович, доктор физико-математических наук, доцент, Санкт-Петербургский государственный университет, физический факультет, профессор;
- Столяров Андрей Владиславович, доктор физико-математических наук, Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, химический факультет, заведующий кафедрой лазерной химии;
- Сурин Леонид Аркадьевич, доктор физико-математических наук, Институт спектроскопии Российской академии наук (ИСАН), дирекция, зам. директора по научной работе

дали положительные отзывы на диссертацию.

Соискатель имеет 10 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации 5 работ, из них 5 статей в международных рецензируемых журналах, индексируемых в базах данных Web of Science, Scopus, RSCI и рекомендованных для защиты в диссертационном совете МГУ по специальности 1.4.4 – «Физическая химия»:

1. Chistikov D.N., Finenko A.A., Lokshtanov S.E., Petrov S.V. and Vigasin A.A. Comprehensive classical analysis of partition function and some observables for weakly interacting polyatomic dimers // The Journal of Chemical Physics. – 2018. – Vol. 149, no 19. – P.194304-1 - 194304-9. (0.6 п.л., вклад Чистикова Д.Н. 75%, JIF WoS: 3.488)
2. Chistikov D.N., Finenko A.A., Lokshtanov S.E., Petrov S.V. and Vigasin A.A. Simulation of collision-induced absorption spectra based on classical trajectories and *ab initio* potential and induced dipole surfaces. I. Case study of N₂–N₂ rototranslational band // The Journal of Chemical Physics. – 2019. – Vol. 151, no. 19. – P. 194106-1 - 194106-13 (0.8 п.л., вклад Чистикова Д.Н. 65%, JIF WoS: 3.488)
3. Odintsova T.A., Serov E.A., Balashov A.A., Koshelev M.A., Koroleva A.O., Simonova A.A., Tretyakov M.Yu, Filippov N.N., Chistikov D.N., Finenko A.A., Lokshtanov S.E., Petrov S.V. and Vigasin A.A. CO₂–CO₂ and CO₂–Ar continua at millimeter wavelengths // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. – 2021 – Vol. 258. – P.107400-1 - 107400-10. (0.6 п.л., вклад Чистикова Д.Н. составляет 60%, JIF WoS: 2.468)
4. Chistikov D.N., Finenko A.A., Kalugina Y.N., Lokshtanov S.E., Petrov S.V. and Vigasin A.A. Simulation of collision-induced absorption spectra based on classical trajectories and *ab initio* potential and induced dipole surfaces. II. CO₂–Ar rototranslational band including true dimer contribution // The Journal of Chemical Physics. – 2021. – Vol. 155, no. 6. – P. 064301-1 - 064301-17. (1 п.л., вклад Чистикова Д.Н. составляет 60%, JIF WoS: 3.488)
5. Chistikov D.N. Magnetic dipole and quadrupole transitions in the $\nu_2+\nu_3$ vibrational band of carbon dioxide // The Journal of Chemical Physics. – 2023. – Vol. 158, no. 13. – P. 134307-1 - 134307-14. (0.9 п.л., вклад Чистикова Д.Н. 100%, JIF WoS: 3.488)

На диссертацию и автореферат поступило 4 дополнительных отзыва, все положительные.

Выбор официальных оппонентов обосновывался их компетентностью в области физической химии, молекулярной спектроскопии и квантовой химии, а также наличием большого количества публикаций в соответствующих областях исследований.

Диссертационный совет отмечает, что представленная диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук является научно-квалификационной работой, в которой автором развивается классический траекторный метод для расчета спектров столкновительно-индуцированного поглощения в дальней ИК области, разрабатывается теоретическая методика расчета колебательно-вращательного магнитно-дипольного спектра молекулы CO_2 , позволившая впервые провести неэмпирическое моделирование запрещенных в дипольном приближении переходов в области комбинационной полосы $\nu_2+\nu_3$ молекулы CO_2 , показав хорошее согласие с экспериментальными данными, и предложен программный пакет для расчета спектров столкновительно-индуцированного поглощения пар, состоящих из жестких молекул, в частности систем $\text{N}_2\text{-N}_2$ и $\text{CO}_2\text{-Ar}$.

Диссертация представляет собой самостоятельное законченное исследование, обладающее внутренним единством. Положения, выносимые на защиту, содержат новые научные результаты и свидетельствуют о личном вкладе автора в науку:

1. Классический траекторный метод оказывается эффективным подходом для решения задачи моделирования спектров СИП в рототрансляционной области для широкого интервала температур и различных молекулярных систем, что подтверждается сравнением с имеющимися экспериментальными данными в дальней ИК и микроволновой области, а также с имеющимися результатами квантово-механического моделирования;
2. Температурные зависимости нулевого и второго спектральных моментов полос столкновительно-индуцированного поглощения для произвольной молекулярной системы могут быть получены с высокой точностью при использовании точной классической функции Лагранжа в сочетании с методами матричного анализа. Эти зависимости могут быть успешно использованы, в частности, для контроля сходимости траекторного расчета спектров СИП;
3. При теоретическом моделировании спектров магнитно-дипольного поглощения в колебательно-вращательных полосах многоатомных молекул для получения количественно верных значений интенсивности необходимо учитывать как вращательный, так и колебательный вклад в магнитный момент.

На заседании 01.12.2023 диссертационный совет принял решение присудить Чистикову Д.Н. ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 16 человек, из них 5 докторов наук по специальности 1.4.4 – «Физическая химия» (физико-математические науки), участвовавших в заседании, из 21 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за – 16, против – 0, недействительных бюллетеней – 0.

Председатель диссертационного совета
д.х.н., доцент

Горюнков А.А.

Ученый секретарь диссертационного совета
к.х.н., доцент

Шилина М.И.

01.12.2023